2M

УДК 681.323

И.Н. Молчанов, В.И. Мова, А.А. Николайчук
Институт кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины,
Государственное научно-производственное предприятие «Электронмаш», г. Киев
molchan@d150.icyb.kiev.ua, poisk@elmash.kiev.ua

Интеллектуальные компьютеры – средство достоверного решения научно-технических задач

В статье рассматриваются проблемы достоверного решения задач науки и инженерии, сводящиеся в конечном итоге к решению задач вычислительной математики с приближенно заданными исходными данными. Для решения проблем достоверности компьютерных результатов предлагается использовать интеллектуальное численное программное обеспечение и библиотеки произвольных разрядных вычислений, а также интеллектуальные параллельные компьютеры Инпарком.

Введение

Непрерывный рост параметров решаемых задач, постановка на компьютерах более полных моделей задач требуют непрерывного роста производительности компьютеров, который реализуется за счет распараллеливания вычислений. Эффективность решения задач науки и инженерии на компьютерах в большой мере зависит от достоверного решения задач вычислительной математики, к которым в конечном итоге они сводятся.

В настоящее время разработано огромное количество программ численного программного обеспечения. Однако во многих случаях их применение при решении прикладных задач не приводит к получению на компьютере результатов, имеющих физический смысл.

Целью данной работы является рассмотрение проблем, определяющих достоверность получаемых результатов при решении задач вычислительной математики, а также концепции интеллектуального компьютера, направленной на автоматизацию процессов исследования задачи в компьютере и ее решения с анализом достоверности получаемых результатов.

Проблемы получения достоверного решения научно-технических задач на компьютере

Рассмотрим проблемы достоверности компьютерных решений на одном классе задач вычислительной математики − решение систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Проблемы достоверности решений задач вычислительной математики рассмотрены в [1].

Решение прикладных задач, как правило, начинается с создания приемлемых физических и математических моделей. Для их построения используют различные гипотезы. Если эти гипотезы верны (погрешность гипотезы отсутствует или достаточно мала), то физическая модель правильно отражает имеющееся в прикладной задаче закономерности. Физическая модель может быть описана с помощью математического аппарата, например, некоторой системой алгебраических уравнений.

При описании физических моделей крайне редко возникают системы:

$$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b} \qquad (1)$$

с точными исходными данными.

Наиболее типичным является задание системы:

$$Ax = b \qquad (2)$$

с приближенно заданными исходными данными и указанием погрешности в исходных данных

$$\|\tilde{A} - A\| = \|\Delta A\| \le \varepsilon_A, \ \|\tilde{b} - b\| = \|\Delta b\| \le \varepsilon_b. \qquad (3)$$

Для удобства решение $\tilde{x}$ системы (1) с точными, но неизвестными исходными данными будем называть *физическим* решением, а точное решение заданной системы (2) − математическим решением задачи. Погрешность в решении x, вызванную неточностью задания исходных данных, называют *наследственной*. Значение ее зависит как от погрешности исходных данных, так и от свойства матрицы системы уравнений.

Рассмотрим некоторые примеры.

Решение системы линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} 100x_1 + 500x_2 = 1700 \\ 15x_1 + 75{,}01x_2 = 255 \end{cases}, \qquad (4)$$

есть $x_1 = 17$, $x_2 = 0$,

а решение системы с приближенно заданными исходными данными:

$$\begin{cases} 100x_1 + 500x_2 = 1700 \\ 15x_1 + 75{,}01x_2 = 255{,}03 \end{cases}, \qquad (5)$$

$x_1 = 2$, $x_2 = 3$.

При решении корректно поставленных задач, наряду с получением единственного классического решения, возникает необходимость в оценке наследственной погрешности или близости математического и физического решений.

Верхнюю границу «относительной» наследственной погрешности точного решения системы можно выразить через «относительные» погрешности заданных матрицы A и вектора b следующим образом [2], [3]:

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \le \frac{\|A\| \|A^{-1}\|}{1 - \|\Delta A\| \|A^{-1}\|} \left[\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right] \qquad (6)$$

или

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \le \frac{\|A\| \|A^{-1}\|}{1 - \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}} \left[\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right] \qquad (7)$$

при условии $\Delta \|A^{-1}\| < 1$ и естественном предположении $\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} < 1$. Обе оценки обычно являются мажорантными. Однако всегда можно построить пример, когда указанная граница достигается, т.е. оценки (6), (7) являются не улучшаемыми на всем классе невырожденных матриц.

Из формул (6), (7) очевидно, что устойчивость решения системы к изменениям исходных данных в значительной степени зависит от величины $\operatorname{cond} A = \|A\| \|A^{-1}\|$, кото-

рая называется *числом обусловленности* матрицы. Если значение $\operatorname{cond} A$ невелико, то матрица A СЛАУ называется *хорошо обусловленной*. Если значение $\operatorname{cond} A$ велико, то матрица такой системы называется *плохо обусловленной*. В зависимости от способов введения норм матрицы рассматривают несколько видов чисел обусловленности матриц [1-7].

Из оценок (6), (7) следует, что достоверность полученного математического решения определяется не только обусловленностью матрицы СЛАУ, но и точностью задания исходных данных.

Величину

$$m = cond\ A\left[\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}\right] \qquad (8)$$

будем называть *числом обусловленности СЛАУ*. Формула (8) увязывает свойства матрицы системы и погрешность в задании исходных данных. В реальных задачах есть смысл рассматривать те системы, для которых оценки числа обусловленности m заметно меньше единицы, например $m \le 0{,}01$.

Повысим точность задания исходных данных в системе (4), а именно рассмотрим систему:

$$\begin{cases} 100x_1 + 500x_2 = 1700 \\ 15x_1 + 75{,}01x_2 = 255{,}000003 \end{cases}, \qquad (9)$$

для которой получаем лучшее приближение к решению задачи (4)

$$x_1 = 16{,}9985 \qquad x_2 = 0{,}003.$$

Отметим, что при решении практических задач часто возникают СЛАУ, порядок которых при определенных исходных данных возрастает. Но при этом зачастую увеличивается также число обусловленности матрицы, т.е. система из хорошо обусловленной может превратиться в плохо обусловленную.

Таким образом, наследственная погрешность решения определяется как значением величины обусловленности m, так и погрешностью задания исходных данных. И если в прикладных задачах нельзя повысить точность задания исходных данных, то эту задачу нужно переформулировать относительно других параметров и провести оценку числа обусловленности новой задачи. Решение СЛАУ без определения оценки числа обусловленности может приводить к компьютерному решению, не имеющему физического смысла.

Вторым источником погрешности решения являются ошибки округления, возникающие при вводе исходных данных задачи в компьютер (погрешность перевода из десятичной системы счисления в машинную, использование элементарных функций, которые в компьютере вычисляются по приближенным формулам и т.д.). Кроме того, ошибки в результатах накапливаются также при реализации вычислительных алгоритмов на компьютере, поскольку все вычисления выполняются с округлением результатов арифметических действий до некоторого фиксированного количества разрядов у мантиссы числа. Таким образом, в результате решения заданной системы (2) на компьютере получают не точное решение $\widetilde{x}$, а некоторое приближенное x, которое называют компьютерным решением.

Следуя [1], [2] будем считать, что суммарное влияние ошибок округления в прямых методах можно рассматривать как соответствующее эквивалентное возмущение исходных данных.

Поэтому вычисленное машинное решение $x^{(1)}$ системы (2) является точным для некоторой возмущенной системы, например:

$$(A + dA)x^{(1)} = b + db \qquad (10)$$

или $$(A+F)x^{(1)} = b \quad (11)$$

и приближенным, не совпадающим с математическим решением системы (2). Здесь dA, db, F – соответствующие эквивалентные возмущения, зависящие от метода решения, порядка системы, длины мантиссы t машинного слова и от погрешностей перевода из десятичной в машинную систему счисления.

Влияние ошибок компьютерной реализации рассмотрим на следующем простом примере [1].

Пусть требуется найти решение систем линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{array}{l} 0{,}135x_1 + 0{,}188x_2 + 0{,}191x_3 + 0{,}178x_4 = 0{,}3516 \\ 0{,}188x_1 + 0{,}262x_2 + 0{,}265x_3 + 0{,}247x_4 = 0{,}4887 \\ 0{,}191x_1 + 0{,}265x_2 + 0{,}281x_3 + 0{,}266x_4 = 0{,}5105 \\ 0{,}178x_1 + 0{,}247x_2 + 0{,}266x_3 + 0{,}255x_4 = 0{,}4818 \end{array}. \quad (12)$$

С учетом того, что в математической задаче правая часть имеет четыре десятичных знака, для решения такой системы одним из прямых методов может быть интуитивно выбрано одинарное машинное слово. В результате решения системы (12) методом LL^T-разложения (метод Холецкого) получаем машинное решение:

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 0{,}25755808 \\ 0{,}58602387 \\ 0{,}63579625 \\ 0{,}47876450 \end{bmatrix}.$$

Вычисление невязки решения $r^{(1)} = b - Ax^{(1)}$ с двойным машинным словом дает:

$$r^{(1)} = \begin{bmatrix} -0{,}326\cdot 10^{-11} \\ 0{,}9\cdot 10^{-10} \\ 0{,}68\cdot 10^{-10} \\ 0{,}95\cdot 10^{-10} \end{bmatrix}.$$

С помощью фортран-программы, реализующей метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцу с одинарным машинным словом, получаем машинное решение:

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 0{,}2169916 \\ 0{,}6105261 \\ 0{,}6459795 \\ 0{,}4727254 \end{bmatrix}.$$

Если использовать С-программу метода Гаусса с выбором главного элемента по столбцу, то получаем следующие результаты:

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 0{,}21508718 \\ 0{,}61167474 \\ 0{,}63645982 \\ 0{,}4724402 \end{bmatrix}.$$

Однако, как нетрудно убедиться, точное математическое решение системы (12) есть

$$x = \begin{bmatrix} 0{,}4 \\ 0{,}5 \\ 0{,}6 \\ 0{,}5 \end{bmatrix}.$$

Решение системы (12) на компьютере с двойным машинным словом методом Гаусса дает компьютерное решение:

$$x = \begin{bmatrix} 0{,}4006006002160911 \\ 0{,}49999998695078 \\ 0{,}59999999984569 \\ 0{,}5000000003221234 \end{bmatrix},$$

почти совпадающее с точным математическим решением задачи (12).

Из этого примера видно, что компьютерное решение задачи может сильно отличаться от ее математического решения.

Ниже рассмотрим некоторые причины такого явления.

В [8-10] для некоторых прямых методов приведены величины, характеризующие оценки норм, эквивалентного возмущения *F*, в частности, для метода Гаусса с выбором главного элемента:

$$\|F\|_E \le 2^{-t} c_1 g(n) \|A\|_E ,$$

где t – длина мантиссы машинного слова; c_1 – константа, независимая от n; $g(n)$ – величина, зависящая от способа выбора главного элемента по всей матрице

$$g(n) < 1{,}8 n^{\frac{1}{4} lg\, n} \max_{i,j} |a_{ij}| .$$

Есть предположение, что для всех действительных матриц: $g(n) \le n \max_{i,j} |a_{ij}|$, а при выборе главного элемента по столбцу: $g(n) \le 2^{n-1} \max_{i,j} |a_{ij}|$.

Анализ суммарных ошибок округления выполненных в [1], [3], [7-9] показал, что с точки зрения устойчивости к ошибкам округления между прямыми методами принципиальной разницы нет. Погрешность компьютерной реализации определяется, с одной стороны, числом обусловленности матрицы, ее порядком, а с другой – методом решения, способом выбора главного элемента и длиной мантиссы. Чем больше значение t, тем меньше эквивалентные возмущения и тем меньше ошибки компьютерной реализации.

Итак, при решении прикладных задач, сводящихся в конечном итоге к решению систем линейных алгебраических уравнений, для компьютерных моделей этих задач необходимо:

– выявить единственное классическое или обобщенное решение;

– определить устойчивость этого решения;

– найти область, в которой компьютерное решение имеет физический смысл.

Провести такие исследования могут только специалисты высокой квалификации, да и то не всегда.

Интеллектуальный компьютер как средство получения достоверного решения

На основе вышеизложенного можно сформулировать требования к перспективным интеллектуальным компьютерам [11], предназначенным для решения задач инженерии и науки:

– интеллектуальный компьютер должен, без участия пользователя, исследовать свойства машинной модели задачи; на основании выявленных свойств, автоматически: строить алгоритм решения, сформировать эффективную топологию из оптимального количества процессоров MIMD-компьютера с точки зрения затрат машинного времени решения задачи, синтезировать программу параллельных вычислений на сформирован-

ной топологии, решить задачу и оценить достоверность решения (близость компьютерного решения к математическому решению и оценка наследственной погрешности);

– интеллектуальный компьютер должен иметь произвольную разрядную арифметику или хотя бы библиотеку программ для работы с произвольной разрядностью для получения компьютерного решения, близкого к математическому решению задачи.

На сегодняшний день численное и прикладное программное обеспечение, которое используется на компьютерах, возлагает оценку достоверности получаемого решения на пользователя, хотя это очень непростая работа, требующая глубоких знаний по вычислительной математике, а также характерных свойств компьютерной модели задачи, математических и технических особенностей компьютера.

Достоверность компьютерных решений практических задач в машиностроении, самолетостроении и многих других отраслях, как правило, проверяется в ходе сопоставления результатов численных и натурных экспериментов, что занимает огромное время и увеличивает стоимость разработки объектов современной техники.

Институт кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины и Государственное научно-производственное предприятие «Электронмаш» совместно разработали семейство интеллектуальных рабочих станций Инпарком [12-14], занимающие по своей производительности промежуточную нишу между персональными и суперкомпьютерами, которые позволяют пользователям работать на суперкомпьютерах с произвольной арифметической разрядностью с помощью библиотек GMP [15] и MPFR [16]. Интеллектуальное численное программное обеспечение исследует свойства компьютерных моделей научно-технических задач с приближенно заданными исходными данными и гарантирует достоверность получаемых решений. Отметим, что произвольная разрядность впервые аппаратно была реализована в 70-х годах XX в. еще на компьютерах серии МИР [17].

Выводы

1. При решении научно-технических задач с приближенно заданными исходными данными на компьютере получаем машинные модели задач, свойства которых отличаются от свойств их математических моделей и, как правило, неизвестны пользователям.

2. Необходимо исследовать характерные свойства машинных моделей задач с целью выбора соответствующих алгоритмов и программ решения с оценками достоверности результатов, а также разрядности вычислений.

3. Интеллектуальный компьютер и интеллектуальное численное программное обеспечение для решения научно-технических задач обеспечивают исследование компьютерной модели задачи и, на основе полученных сведений, автоматическое построение алгоритма и синтез программы решения задачи с оценками достоверности на необходимой разрядности.

Литература

1. Молчанов И.Н. Машинные методы решения прикладных задач. Алгебра и приближение функций / Молчанов И.Н. – К. : Наук. думка, 1987. – 287 с.
2. Глушков В.М. О наборе программ для решения систем линейных алгебраических уравнений на машинах серии МИР / В.М. Глушков, И.Н. Молчанов, Л.Д. Николенко // Кибернетика. – 1968. –№ 6. – С. 1-6.
3. Уилкинсон Дж.Х. Алгебраическая проблема собственных значений / Уилкинсон Дж.Х. – М. : Наука, 1970. – 564 с.
4. Фаддеев Д.К., Фаддеева В.*Н.* О плохо обусловленных системах линейных уравнений // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 1961. – 1, № 3. – С. 412-417.
5. Фаддеев Д.К. Вычислительные методы линейной алгебры / Д.К. Фаддеев, В.Н. Фаддеева. – Л.: Наука, 1945. – 264 с. // Зап. науч. семинаров, Ленинград, Отд. математики ин-та им. В.А. Стеклова АН СССР; Т. 54. – 264 с.
6. Фаддеев Д.К. Вычислительные методы линейной алгебры / Д.К. Фаддеев, В.Н. Фаддеева – М. : Физматгиз, 1963. 736 с.

7. Воеводин В.В. Ошибки округления и устойчивость прямых методов линейной алгебры / Воеводин В.В. – М. : Изд-во Моск. ун-та, 1969. – 154 с.
8. Воеводин В.В. Линейная алгебра / Воеводин В.В. – М. : Наука, 1974. – 336 с.
9. Wilkinson J.H. Rounding Errors in Algebraic Processes / J.H. Wilkinson // Notes of Appl. Science. – London: Her Majesty's Stationary Office. –1963. – № 32. – 162 p.
10. Форсайт Дж. Машинные методы математических вычислений / Дж. Форсайт, М. Малькольм, К. Моулер. – М. : Мир, 1980. – 280 с.
11. Молчанов И.Н. Интеллектуальн ые компьютеры – средство исследования и решения научно-технических задач / И.Н. Молчанов // Кибернетика и системный анализ. – 2004. – № 1. – С. 174-179.
12. Молчанов И.Н. Инпарком-16 – интеллектуальная рабочая станция / И.Н. Молчанов, О.Л. Перевозчикова, А.Н. Химич // Кибернетика и системный анализ. – 2007. – № 3. – С. 151-156.
13. Молчанов И.Н. Интеллектуальный MIMD-компьютер Инпарком – база для организации численных экспериментов в инженерии и науки / И.Н. Молчанов, В.И. Мова, В.А. Стрюченко // Научно-технический журнал. – 2007.– № 4 (40).
14. Молчанов И.Н. Опыт разработки семейства кластерных компьютеров Инпарком / И.Н. Молчанов, Ревозчикова О.Л., Химич А.Н. // Кибернетика и системный анализ. – 2009. – № 6. – С. 88-96.
15. GMP − GNU MP Copying Conditions [Электронный ресурс]. – Режим доступа : http://gmplib.org/
16. MPFR − MultiPrecision Float with Rounding [Электронный ресурс]. – Режим доступа : http://www.mpfr.org/
17. Программное обеспечение ЭВМ МИР-1 и МИР-2. Программы / [Глушков В.М., Молчанов И.Н., Стогний А.А. и др.]. – Том 1, 2, 3. – К. : Наук. думка, 1976.

Literatura

1. Molchanov I.N. Mashinnye метogy resheniya prikladnykh zadach. Algebra i priblizhenie funktsiiy. K.: Nauk. dumka, 1987. – 287 s.
2. Glushkov V.M., Molchanov I.N., Nikolenko L.D. O nabore programm dlya resheniya sistem lineiynykh algebraicheskikh uravneniiy na mashinakh serii MIR // Kibernetika. 1968. № 6. S. 1-6.
3. Wilkinson J.H. Algebraicheskaya problema sobstvennykh znacheniiy. M.: Nauka, 1970. 564 s.
4. Fadeev D.K., Fadeeva V.N. O plokho obuslovlenykh sistemakh lineiynykh uravneniiy // Zhurn. vychisl. матematiki i mat. fiziki. 1961. 1, № 3. S. 412-417.
5. Fadeev D.K., Fadeeva V.N. Vychislitelnye metody lineinoiy algebry. L.: Nauka, 1945.264 s. // Zap. nauch. seminarov, Leningrad, Otd. matematiki in-ta im. V.A. Steklova AN SSSR; T. 54. 264 s.
6. Fadeev D.K., Fadeeva V.N. Vychislitelnye metody lineinoiy algebry. – M.: Fizmatgiz, 1963. 736 s.
7. Voevodin V.V. Oshibki okrugleniya i ustoiychivost pryamykh metodov lineiynoiy algebry. – M.: Izd-vo Mosk. un-ta, 1969. 154 s.
8. Voevodin V.V. Lineiynaya algebra. M.: Nauka, 1974. 336 s.
9. Wilkinson J.H. Rounding Errors in Algebraic Processes // Notes of Appl. Science. London: Her Majesty's Stationary Office. 1963. № 32. 162 p.
10. Forsaiyt J., Malkolm M., Mouler K. Mashinnye метоdy матematicheskikh vuchisleniiy. – M.: Mir, 1980. – 280 s.
11. Molchanov I.N. Intellektualnye kompjutery – sredstvo issledovaniya i resheniya nauchno-tekhnicheskikh zadach// Kiberenetika i sistemnyiy analiz., 2004, № 1, S. 174-179.
12. Molchanov I.N., Perevozchikova O.L., Khimich A.N. Inpakom-16 – intellektualnaya rabochaya stantsiya // Kiberenetika i sistemnyiy analiz. 2007.№ 3.S. 151-156.
13. Molchanov I.N., Mova V.I., Stryuchenko V.A. Intelleknualnyiy MIMD-кompjuter Inparkom – basa dlya organizatsii chislennykh eksperimentov v inzhenerii i nauki// Nauchno-tekhnicheskiiy zhurnal 4(40).2007.
14. Molchanov I.N., Perevozchikova O.L., Khimich A.N. Opyt razrabotki semeiystva klasternykh kompjuterov Inparkom// Kiberenetika I sistemnyiy analiz. 2009.№ 6.S. 88-96.
15. GMP − GNU MP Copying Conditions. http://gmplib.org/
16. MPFR − MultiPrecision Float with Rounding. http://www.mpfr.org/
17. Glushkov V.M., Molchanov I.N. ,Stogniiy A.A. i dr. Programmnoe obespechenie EVM MIR-1 i MIR-2. Programmy. Tom 1, 2, 3. – K.: Nauk. dumka, 1976.

I.N. Molchanov, V.I. Mova, A.A. Nickolaychuk

Intelligent Computers − a Tool for the Reliable Solving of Scientific and Engineering Problems

The article deals with problems of the reliable solving of problems in science and engineering ultimately reduced to the solving of problems of the computational mathematics with approximately given initial data. Intelligent numerical software and libraries of programs for arbitrary precision computations as well as intelligent parallel computers Inparcom are proposed to be used for the resolving of the reliability problem of computer results.

Статья поступила в редакцию 10.06.2011.